

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

☐ posudek vedoucího ☒ posudek oponenta
☒ bakalářské práce ☐ diplomové práce

Autor: Petr Lukeš

Název práce: Báze vlnových balíků v popisu rezonančního rozptylu

Studijní program a obor: fyzika, obecná fyzika

Rok odevzdání: 2017

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Karel Houfek, Ph.D.

Pracoviště: ÚTF MFF UK

Kontaktní e-mail: Karel.Houfek@mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:

☐ vynikající ☐ velmi dobrá ☒ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Věcné chyby:

☐ téměř žádné ☒ vzhledem k rozsahu přiměřený počet ☐ méně podstatné četné ☐ závažné

Výsledky:

☐ originální ☒ původní i převzaté ☐ netriviální kompilace ☐ citované z literatury ☐ opsané

Rozsah práce:

☐ veliký ☒ standardní ☐ dostatečný ☐ nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

☐ vynikající ☐ velmi dobrá ☒ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Tiskové chyby:

☐ téměř žádné ☒ vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet ☐ četné

Celková úroveň práce:

☐ vynikající ☐ velmi dobrá ☒ průměrná ☐ podprůměrná ☐ nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky oponenta:

Uchazeč se ve své práci seznámil se základy teorie rozptylu a dále s použitím tzv. báze vlnových balíků k výpočtu fázového posunutí. Napsal vlastní program sloužící k testování této báze v jednorozměrných rozptylových problémech.

Práce se soustředí především na studium vlivu konstrukce báze vlnových balíků na přesnost výpočtu poloh a šířek rezonancí fitováním fázových posunutí. Jde zejména o závislost na velikosti rozsahu energií, na kterém je báze konstruována, a dále na rozdělení tohoto rozsahu na podintervaly, na kterých jsou jednotlivé báze funkce definovány. Výsledky práce ukázaly, jakým způsobem zvolit tuto bázi pro jednorozměrné modely k dosažení určité přesnosti určení poloh a šířek rezonancí.

Pokud jde o odbornou stránku, lze práci v první řadě vytknout některé nepřesnosti ve formulacích. Např. způsob odvození Lippmannovy-Schwingerovy rovnice v podkap. 1.1 bez jasného uvedení okrajových podmínek je poměrně problematický, přepis této rovnice s abstraktního vyjádření (1.4) do x -reprezentace (1.8) bych rozhodně nenazýval „řešení“, v podkap. 1.2 je nejprve uvedeno, že vlnová funkce bude pouze záviset na radiální souřadnici (pro s -vlnu) a až poté je uveden předpoklad sférické symetrie potenciálu, ke konci podkap. 1.2, kde je uvedeno, že radiální souřadnice reprezentuje celý třírozměrný prostor apod. V popisu výpočtu fázového posunutí v podkap. 1.4 jsou v rovnici (1.47) použity veličiny D_j , které ale nejsou nikde definovány a přitom jsou pro výpočet fázového posunutí pomocí rovnice (1.49) zcela zásadní.

Kromě těchto formulačních nedostatků bych řekl, že zkoumaná metoda mohla být lépe ilustrována a zhodnocena. Přestože je studovaná metoda určení polohy a šířky rezonancí založena na fitování fázových posunutí, v celé práci je ukázán pouze jediný graf fázového posunutí (obr. 2.2), který navíc pouze ilustruje nevhodnost použití určité báze, aniž by graf obsahoval správná data pro porovnání. Bylo by vhodné ukázat několik dalších fázových posunutí a také výsledků jejich fitování. Výsledky výpočtů jsou porovnávány pouze s referenčními hodnotami poloh a šířek rezonancí pro zvolené modely, přičemž není zcela jasné, zda pozorované rozdíly jsou způsobeny nepřesným výpočtem fázových posunutí, nebo následným fitováním. Myslím, že by bylo vhodné otestovat studovanou metodu též pomocí modelového problému, u kterého je známé přesné fázové posunutí (např. pro potenciál $V(r) = V_0 \exp(-a r)$), a zjistit, zda lze najít takovou bázi vlnových balíků, která by se zadanou přesností zreprodukovala správné fázové posunutí na určitém rozsahu energií.

Po formální a jazykové stránce obsahuje předložená práce poměrně dost nedostatků, kterým se dalo pečlivějším projitím celého textu snadno vyhnout. Níže jsou uvedeny pouze některé nedostatky:

- 1) V druhé kapitole, kde se studuje vliv volby báze na přesnost výsledků, jsou ukázky výsledků pro modelové problémy bez odkazu na následující kapitulu, kde jsou teprve tyto modely definovány. Modely by měly být popsány dříve, než se ukazují výsledky.
- 2) V první kapitole autor používá jednotky SI, kdežto od druhé kapitoly používá atomové jednotky, aniž by to bylo explicitně uvedeno. Výrazy typu $E_{\text{res}} - 1$ bez uvedení jednotek nedávají smysl.
- 3) V několika rovnicích jsou drobné nepřesnosti, např. v rovnici (1.4) je vektor místo ketu, v (1.13) je x místo a , v (1.23) chybí derivace podle r , v rovnicích (1.47) a (1.49) je nekonzistentní značení u E_{0j} a E_{j0} .

- 4) Grafy často nemají popsané osy, případně též chybí jednotky, aniž by bylo jasné uvedeno, že je vše v atomových jednotkách.
- 5) Anglický jazyk nebyl podle mého názoru příliš dobrou volbou pro bakalářskou práci. Kromě standardních problémů se členy se v práci vyskytuje relativně dost pravopisných chyb a neanglických spojení, např. energetic spectrum místo energy spectrum, energetic wells místo potential wells, Shrödinger místo Schrödinger, na straně 10 se v jednom odstavci vyskytují tři verze zápisu jména Lifshitz (též Lifshits a Liftshitz), častá záměna then a than, použití asses místo assess, decease místo decrease, full místo fill apod.
- 6) Text obsahuje několik nekonzistentních míst, např. popis kapitol v úvodu, výklad na konci podkap. 1.2, kdy je nejprve uvedeno, že radiální Schrödingerova rovnice představuje „completely the same problem“ jako v jednorozměrném případě, ale vzápětí se popisují rozdíly apod.

I přes četné, výše uvedené výhrady považuji předloženou práci za dostatečnou k uznání za bakalářskou práci. Přestože navrhuji hodnocení dobře, řekl bych, že je práce spíše mezi velmi dobře a dobře a konečné hodnocení bych stanovil podle obhajoby a reakcí na níže uvedené otázky.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- 1) V kapitole věnované teorii je na konci uveden výpočet fázového posunutí pomocí funkce spektrálního posunu. Ve vzorcích (1.47) a (1.49) se vyskytují výrazy D_j , které nejsou nikde definovány. Uchazeč by měl vysvětlit, jak tyto výrazy počítá.
- 2) Na obrázku 2.2 je ukázáno jediné fázové posunutí pro model B, které vykazuje velice zvláštní chování zdůvodněné nevhodnou volnou bází. Jde opravdu o správné hodnoty, nebo o numerický artefakt? Mohl byste ukázat fázové posunutí pro tento model spočtené v jiných bázích s rozděleními energetických podintervalů podle obr. 2.3?
- 3) Uchazeč by též mohl ukázat několik příkladů fitování fázových posunutí a ilustrovat problematické případy, kdy šířka rezonance byla určena s poměrně velkou chybou.

Práci

☒ doporučuji
☐ nedoporučuji
uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

☐ výborně ☐ velmi dobře ☒ dobře ☐ neprospěl

Místo, datum a podpis oponenta: V Praze dne 16. 6. 2017